Crystal Structure of Ethoxidine, A Synthetic Quaternary Benzo[c]phenanthridine

Titre	Crystal Structure of Ethoxidine, A Synthetic Quaternary Benzo[c]phenanthridine
Type de publication	Article de revue
Auteur	Helesbeux, Jean-Jacques [1], Vanquelef, Enguerran [2], Guillon, Jean [3], Léger, Jean-Michel [4], Duval, Olivier [5]
Pays	pays multiples
Editeur	Plenum Press ; Springer
Ville	New-York ; Berlin
Type	Article scientifique dans une revue à comité de lecture
Année	2011
Langue	Anglais
Date	2011/12/01
Numéro	12
Pagination	1945 - 1948
Volume	41
Titre de la revue	Journal of Chemical Crystallography
ISSN	1572-8854
Mots-clés	Benzo[c]phenanthridine [6], Crystallography [7], Ethoxidine [8], Inorganic [9], Organometallic [10], Physical [11], X-ray [12]
Résumé en anglais	The complete structure of N-methyl-12-ethoxy-2,3,8,9-tetramethoxybenzo[c]phenanthridinium methylsulfonate salt 1, also named ethoxidine, was established by a single-crystal X-ray analysis. The crystal is triclinic, space group P1− with a = 14.1836 (11), b = 14.2803 (11), c = 14.3073 (12) Å, β = 77.699 (5)°, V = 2422.3 (3) Å3, Z = 4, 2 C25H29NO8S, D c = 1.381 g/cm3, μ (CuKα) = 1.5418 Å, S = 1.036, F (000) = 1064.00, R = 0.0594 and wR = 0.1446. In the unit cell, there are two independent molecules. Solid-state data could be used to enlighten the biological mechanism of action.
URL de la notice	http://okina.univ-angers.fr/publications/ua16 [13]
DOI	10.1007/s10870-011-9986-9 [14]
Lien vers le document	http://dx.doi.org/10.1007/s10870-011-9986-9 [14]

Liens

[1] http://okina.univ-angers.fr/jeanjacques.helesbeux/publications
[2] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[author]=94
[3] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[author]=95
[4] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[author]=96

[5] http://okina.univ-angers.fr/olivier.duval/publications
[6] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=32
[7] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=33
[8] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=34
[9] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=188
[10] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=189
[11] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=190
[12] http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=191
[13] http://okina.univ-angers.fr/publications/ua16
[14] http://dx.doi.org/10.1007/s10870-011-9986-9